$\int_0^\infty f(x) x^\alpha e^{-x}dx$で定義される特殊関数の数値計算 (非線型方程式の数値解析)

森, 正武

数理解析研究所講究録
190巻 1973年 166-172

$\int_0^\infty f(x)x^\alpha e^{-x}dx$ で定義される特殊関数の数値計算

京大 数研　　森 正武

§1 はじめに

半無限区間の積分

$$I=\int_0^\infty f(x)\,x^\alpha e^{-x}dx \quad , \quad \alpha>-1 \tag{1}$$

で定義される特殊関数の値を，数値積分によって計算する一つの方法を述べる。積分 (1) に対して変数変換

$$x=e^u \tag{2}$$

を適用すると

$$I=\int_{-\infty}^\infty f(e^u)\exp\left[(\alpha+1)u-e^u\right]du \tag{3}$$

となる。これにきざみ h の台形則を適用すると (1) に対する数値積分公式

$$I_h=h\sum_{n=-\infty}^\infty f(e^{nh})\exp\left[(\alpha+1)nh-\exp(nh)\right] \tag{4}$$

を得る。和の上下限は適当に打切る。

われわれは以前に，この公式にある補正を加えることにより、指定した相対精度を持つ (1) の積分値を計算することができると述べた[1)]。しかしこれは誤りで,計算できるのは指定した絶対精度をもつ (1) の積分値である。ここにこの誤りを訂正し，正しい誤差解析と数値例を挙げておく。

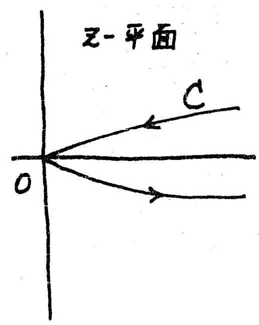
補正を伴うこの公式による積分は，2重指数関数型数値積分公式[1)] に比較して能率はかなり劣る。しかし，誤差評価が著しく容易であること，およびその誤差が $f(x)$ の形にほとんど依存せず一様に $\exp(-\pi^2/h)$ 程度で与えられることが大きな特徴である。

§2　公式の誤差と補正

よく知られた特殊関数はたいていそうであるように，$f(x)$ は原点および正の実軸上には特異点を持たない有理関数であるとする。このとき公式 (4) の誤差は

$$\Delta I = I - I_h = \frac{1}{2\pi i}\int_C \Phi(z) f(z) z^{\alpha} e^{-z} dz \qquad (5)$$

で与えられる。ただし積分路 C は第1図のような路で，誤差の特性関数は次式で定義される[1)]。



第1図

$$\Phi(z) = \begin{cases} \dfrac{-2\pi i}{1-\exp\left(-\frac{2\pi i}{h}\log z\right)} \simeq +2\pi i \exp\left(+\frac{2\pi i}{h}\log z\right) & ; \mathrm{Im}\, z > 0 \\ \dfrac{+2\pi i}{1-\exp\left(+\frac{2\pi i}{h}\log z\right)} \simeq -2\pi i \exp\left(-\frac{2\pi i}{h}\log z\right) & ; \mathrm{Im}\, z < 0 \end{cases} \tag{6}$$

積分のきざみhは十分小さくとるものとして，$f(z)z^{\alpha}$に対して次の仮定をおく。

$$|z| \simeq \frac{2\pi}{h} \quad \text{のとき} \quad f(z) \simeq C z^{\sigma} \tag{7}$$

$$\frac{2\pi}{h} \gg |\alpha + \sigma| \tag{8}$$

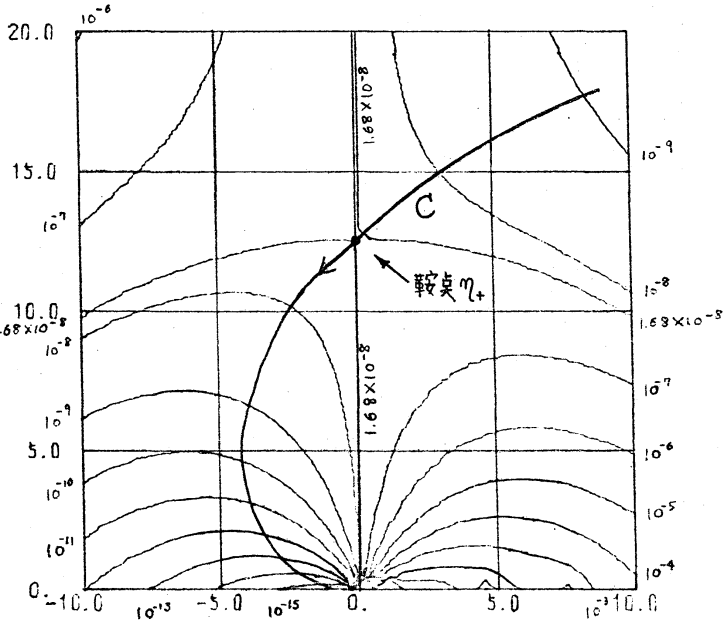
このとき (5) の被積分関数

$$g(z) \equiv \Phi(z) f(z) z^{\alpha} e^{-z} \tag{9}$$

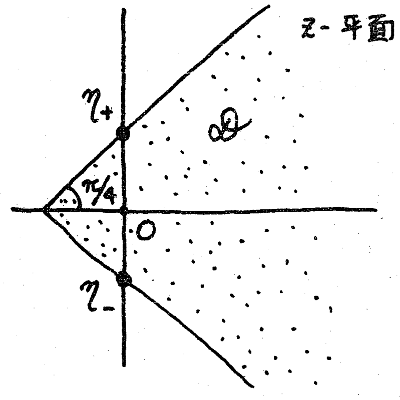
の絶対値の鞍点はほゞ

$$\eta_{\pm} \simeq \pm \frac{2\pi i}{h} \tag{10}$$

に存在することがわかる。第２図に鞍点η_+附近の$|\Phi(z)e^{-z}|$の等高線図を$h=0.5$の場合について示した。



第２図



オ 3 図

いまオ3図に示すような，$z=\eta_\pm$ を通り実軸と45°をなす半直線の右側の z-平面内の領域を $\mathcal{D}$ とする。もし $\mathcal{D}$ の内部に $f(z)$ の特異点がなければ，オ1図の積分路Cを変更してオ2図のようにそれが $z=\eta_\pm$ を通過するようにすれば，鞍点法の公式から $|\Delta I|$ は近似的に次式のように評価できる[2)]。

$$|\Delta I| \simeq \frac{4\pi}{\sqrt{h}}\left(\frac{2\pi}{h}\right)^{\alpha}\exp\left(-\frac{\pi^2}{h}\right)|f(\eta)| \qquad (11)$$

もし $\mathcal{D}$ 内に特異点 $\zeta_j,\ j=1,2,\cdots$ が存在すると，積分路を上と同じに変更するときその特異点をよぎるが，それからの寄与は留数定理によって

$$I - I_h = -\sum_j \Phi(\zeta_j)\,\zeta_j^{\alpha}\exp(-\zeta_j)\,\mathrm{Res}_j(f) + \Delta I_0 \qquad (12)$$

と表わされる。ここで $\mathrm{Res}_j(f)$ は ζ_j における f の留数で，誤差 $|\Delta I_0|$ は (11) と全く同じ式で評価される。(12) の右辺オ1項は初等関数によって具体的に計算可能である。

したがって $\mathcal{D}$ の内部に $f(z)$ の特異点がなければ (4) の I_h そのまま，もし特異点があれば (4) の I_h に補正項

$$T_c = -\sum_j \Phi(\zeta_j)\,\zeta_j^{\alpha} \exp(-\zeta_j)\,Res_j(f) \tag{13}$$

を加えれば，誤差が (11) で評価できるような結果が得られる。なお (11) のうち支配的な項は $\exp(-\frac{\pi^2}{h})$ である。

§3　数値例

積分指数関数，積分三角関数の補助関数，ガンマ関数の計算に上述の方法を実際応用した例を示す．いずれも積分のきざみ巾は $h = 0.5$ とした。ΔI_{obs} は実際の計算誤差，ΔI_{comp} は補正を行ったときの誤差，$|\Delta I_{est}|$ は (11) による誤差評価である。N は積分に要した標本点の数である。

(i)　積分指数関数

$$I = e^{-p}\int_0^\infty \frac{e^{-x}}{x+p}\,dx\ , \quad p = 1 \tag{14}$$

この例では補正項 T_c は不要である。

$$\Delta I_{obs} = -1.3\times10^{-9}\ ,\ |\Delta I_{est}| = 1.4\times10^{-9},\ N = 54\ . \tag{15}$$

(ii)　積分三角関数の補助関数 (a)[3]

$$I = p\int_0^\infty \frac{e^{-x}}{x^2+p^2}\,dx\ , \quad p = 1 \tag{16}$$

このとき $f(z) = p/(z^2+p^2)$ は $z = \pm ip$ に単純な極をもつ。

したがって補正項は (13) より

$$T_c = -\frac{\pi}{p}\times\left[\frac{e^{-ip}}{1-\exp\left(-\frac{2\pi i}{h}\log p+\frac{\pi^2}{h}\right)}+\frac{e^{ip}}{1-\exp\left(\frac{2\pi i}{h}\log p+\frac{\pi^2}{h}\right)}\right]\times p \tag{17}$$

$$\simeq 2\pi\cos\left(\frac{2\pi}{h}\log p-p\right)\exp\left(-\frac{\pi^2}{h}\right) \tag{18}$$

と計算される．$p=1$ のときこの値は

$$T_c \simeq 9.0821\times10^{-9} \tag{19}$$

である．

$$\Delta I_{obs}=-8.9\times10^{-9},\ \Delta I_{comp}=1.6\times10^{-10},\ |\Delta I_{est}|=3.0\times10^{-10},\ N=49 \tag{20}$$

(iii) 積分三角関数の補助関数 (b)[3)]

$$I=\int_0^\infty \frac{xe^{-x}}{x^2+p^2}dx \quad , p=1 \tag{21}$$

例 (ii) と同様補正項 T_c は近似的に

$$T_c \simeq -2\pi\sin\left(\frac{2\pi}{h}\log p-p\right)\exp\left(-\frac{\pi^2}{h}\right) \tag{22}$$

と計算され，$p=1$ のときこの値は次のようになる．

$$T_c \simeq 1.4145\times10^{-8} \tag{23}$$

$$\Delta I_{obs}=-1.8\times10^{-8},\ \Delta I_{comp}=-3.4\times10^{-9},\ |\Delta I_{est}|=3.8\times10^{-9},\ N=30 \tag{24}$$

(iv) ガンマ関数

$$I=\int_0^\infty x^{p-1}e^{-x}dx \quad , p=0.5 \quad (\alpha=p-1=-0.5) \tag{25}$$

$$\Delta I_{obs}=-1.0\times10^{-8},\ |\Delta I_{est}|=1.3\times10^{-8},\ N=90 \tag{26}$$

以上述べてきた方法は，上記のパラメーター p が複素数のとき，すなわち複素変数の特殊関数の計算に対しても適用可能である。

参考文献

1) 高橋・森：変数変換によって得られる数値積分公式 (2)：京都大学数理解析研究所講究録 172 (1973) p.88.

2) 森・名取：解析関数の多項式近似とその誤差解析：同上 153 (1972) p.1.

3) Abramowitz and Stegun: Handbook of Mathematical Functions, NBS. p.232.